

Esame scritto di Meccanica Quantistica: soluzioni

19 febbraio 2009

L'Hamiltoniana definita da:

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + V(\vec{x}_1) + V(\vec{x}_2) + \mathcal{H}_s \quad (1)$$

dove

$$V(\vec{x}) = \sum_{i=1}^3 W_i(x^{(i)}) \quad W(z) = \begin{cases} 0 & \text{se } |z| \leq a_j \\ \infty & \text{se } |z| > a_j \end{cases} \quad (2)$$

corrisponde ad un sistema di due particelle in una buca di potenziale infinita di dimensioni $2a_1 \times 2a_2 \times 2a_3$ interagenti tramite l'Hamiltoniana di spin:

$$\mathcal{H}_s(\sigma_1, \sigma_2) = B_0 \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2. \quad (3)$$

1. Decomposizione spaziale

L'Hamiltoniana totale del sistema può essere ridotta alla somma di tre Hamiltoniane unidimensionali più l'interazione di spin, separando la parte spaziale nelle tre componenti:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^3 \left[H_i(x_1^{(i)}) + H_i(x_2^{(i)}) \right] + \mathcal{H}_s \quad (4)$$

dove H_i è l'Hamiltoniana di una particella in una scatola unidimensionale di larghezza $2a_i$. Poiché le sette hamiltoniane che compaiono a membro destro della eq. (4) commutano fra loro, gli autovalori e gli autostati di \mathcal{H} possono essere espressi in termini di autovalori ed autostati di esse. La base degli autostati di \mathcal{H} può essere quindi scritta formalmente come:

$$\{|p_1^{(1)}, p_1^{(2)}, p_1^{(3)}, \vec{\sigma}_1\rangle \otimes |p_2^{(1)}, p_2^{(2)}, p_2^{(3)}, \vec{\sigma}_2\rangle\}. \quad (5)$$

Dal momento che l'interazione dipende soltanto dallo spin, la parte spaziale della funzione d'onda si fattorizza nella forma:

$$\psi_{\vec{n}_1, \vec{n}_2}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2) = \phi(\vec{x}_1)_{\vec{n}_1} \phi(\vec{x}_2)_{\vec{n}_2} \chi(\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2) \quad (6)$$

dove $\vec{n}_i = (n_i^{(1)}, n_i^{(2)}, n_i^{(3)})$ ed $n_i^{(j)} = 1, 2, 3 \dots$ e avendo definito le funzioni unidimensionali:

$$\phi(\vec{x})_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{a_1 a_2 a_3}} f_{n^{(1)}}(x^{(1)}) f_{n^{(2)}}(x^{(2)}) f_{n^{(3)}}(x^{(3)});$$

$$f_n(x) = \begin{cases} \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) & n \text{ dispari} \\ \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) & n \text{ pari} \end{cases} \quad (7)$$

2. Spettro di \mathcal{H}

Riscrivendo l'interazione di spin come $\mathcal{H}_s = \frac{B_0}{2}(J^2 - \sigma_1^2 - \sigma_2^2)$, dove $\vec{J} = \vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2$ rappresenta lo spin totale del sistema, lo spettro di \mathcal{H}_s è dato da:

$$E_j = \frac{\hbar^2}{2} B_0 \left(j(j+1) - \frac{3}{2} \right) = \begin{cases} \hbar^2 B_0 \frac{1}{4}; & j = 1, \text{ tre volte deg.} \\ -\hbar^2 B_0 \frac{3}{4}; & j = 0, \text{ non deg.} \end{cases} \quad (8)$$

3. Energia e degenerazione degli stati

Lo spettro dell'hamiltoniana è dato da

$$E = \sum_{k=1}^3 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma_k^2} \left[\left(n_1^{(k)} \right)^2 + \left(n_2^{(k)} \right)^2 \right] + \frac{\hbar^2}{2} B_0 \left(j(j+1) - \frac{3}{2} \right). \quad (9)$$

Ne segue che lo stato fondamentale corrisponde al caso in cui tutti gli $n_{1,2}^{(i)}$ sono uguali a 1 con $j = 0$. Con questa configurazione si ha l'energia:

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4m} \left(\frac{1}{a_1^2} + \frac{1}{a_2^2} + \frac{1}{a_3^2} \right) - \frac{3}{4} \hbar^2 B_0 \quad (10)$$

L'energia dello stato eccitato dipende dal modo in cui l'interazione \mathcal{H}_s risolve la degenerazione di spin. Per valori opportuni di B_0 , l'ordinamento dei livelli determinato dalla sola parte spaziale dell'energia ($B_0 = 0$), non viene alterato dall'interazione di spin (vedere punto 5).

Per particelle distinguibili, nel caso in cui $a_1 < a_2 < a_3$ con a_j incommensurabili, le energie associate alle tre componenti dell'impulso sono sempre diverse, quindi le uniche fonti di degenerazione provengono dal valore di m_j , la terza componente dello spin totale e dalle possibili combinazioni equivalenti dei numeri quantici $n_{1,2}^{(i)}$. Il calcolo della degenerazione per lo stato fondamentale è banale dal momento che $j = 0$ ed $m_j = 0$, ovvero, soltanto una configurazione di numeri quantici corrisponde allo stato fondamentale e questo resta vero anche per a_j tutti uguali tra loro.

Il primo stato eccitato corrisponde agli stati con tutti gli $n_{1,2}^{(i)}$ pari a 1 ma con $j = 1$, quindi l'energia è

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4m} \left(\frac{1}{a_1^2} + \frac{1}{a_2^2} + \frac{1}{a_3^2} \right) + \frac{1}{4} \hbar^2 B_0. \quad (11)$$

Questo stato ha degenerazione tre, corrispondente ai tre valori di $m_j = -1, 0, 1$.

Per il secondo stato eccitato nel caso in cui $a_1 < a_2 < a_3$, l'energia associata corrisponde all'eq. (9) con $j = 0$ ed $n_{1,2}^{(k)} = 1$ per $k \neq 3$ mentre $(n_1^{(3)}, n_2^{(3)}) = (1, 2)$ oppure $(n_1^{(3)}, n_2^{(3)}) = (2, 1)$, quindi l'energia è

$$E_2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} \left(\frac{2}{a_1^2} + \frac{2}{a_2^2} + \frac{4}{a_3^2} \right) - \frac{3}{4} \hbar^2 B_0 \quad (12)$$

e la degenerazione è 2, corrispondente alla degenerazione di scambio. Nel caso in cui $a_1 = a_2 = a_3$, la differenza sta nel fatto che possiamo porre $n_{1,2}^{(k)} = 2$ per tutti i valori di k e per entrambe le particelle, quindi si ottiene un numero di stati pari a 6. L'energia è sempre data dalla eq. (12), con $a_1 = a_2 = a_3$.

4. Particelle identiche

Se le due particelle nella buca sono identiche, occorre contare il numero di stati che non differiscono soltanto per lo scambio delle due particelle, inoltre, dal momento che si tratta di due fermioni, occorre imporre l'antisimmetria della funzione d'onda, tenendo conto che gli stati:

$j = 0$	$ \uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle$	$m_j = 0$
$j = 1$	$ \uparrow\uparrow\rangle$	$m_j = 1$
	$ \uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle$	$m_j = 0$
	$ \downarrow\downarrow\rangle$	$m_j = -1$

sono simmetrici per $j = 1$, antisimmetrici per $j = 0$.

Dall'espressione ottenuta per le funzioni d'onda (eq. (6)), lo stato fondamentale:

$$\psi_{\bar{1},\bar{1}}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, j = 0, m_j = 0) = \phi_{(1,1,1)}(x_1)\phi_{(1,1,1)}(x_2)\chi(j = 0) \quad (13)$$

è già antisimmetrico poiché la parte spaziale è simmetrica mentre la parte di spin è antisimmetrica. Lo stato fondamentale continua ad essere non degenero come nel caso del punto precedente.

Quello che, nel caso di particelle distinguibili, era il primo stato eccitato:

$$\psi_{\bar{1},\bar{1}}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, j = 1) = \phi_{(1,1,1)}(x_1)\phi_{(1,1,1)}(x_2)\chi(j = 1) \quad (14)$$

nel caso di particelle identiche non esiste più perché totalmente simmetrico, sia nella parte spaziale che nella parte di spin.

Il primo stato eccitato nel caso di particelle identiche è dato, quindi, dalla configurazione in cui i sei valori di $n_{1,2}^{(i)}$ valgono 1 tranne uno dei due corrispondenti al a_3 , nel caso a) $a_1 < a_2 < a_3$ o tranne uno qualunque dei sei, nel caso b) $a_1 = a_2 = a_3$. Quindi, tenendo conto che la parte di spin è

antisimmetrica ($j = 0$) e simmettizzando la parte spaziale si ottiene, per il primo stato eccitato, l'espressione:

$$\psi'(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{(1,1,2)}(x_1)\phi_{(1,1,1)}(x_2) + \phi_{(1,1,1)}(x_1)\phi_{(1,1,2)}(x_2)) \cdot \chi(j = 0, m_j = 0) \quad (15)$$

nel caso a), mentre nel caso b) si ottengono i tre stati:

$$\psi'_a(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{(1,1,2)}(x_1)\phi_{(1,1,1)}(x_2) + \phi_{(1,1,1)}(x_1)\phi_{(1,1,2)}(x_2)) \cdot \chi(j = 0, m_j = 0) \quad (16)$$

$$\psi'_b(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{(1,2,1)}(x_1)\phi_{(1,1,1)}(x_2) + \phi_{(1,1,1)}(x_1)\phi_{(1,2,1)}(x_2)) \cdot \chi(j = 0, m_j = 0) \quad (17)$$

$$\psi'_c(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{(2,1,1)}(x_1)\phi_{(1,1,1)}(x_2) + \phi_{(1,1,1)}(x_1)\phi_{(2,1,1)}(x_2)) \cdot \chi(j = 0, m_j = 0). \quad (18)$$

La degenerazione è sempre la metà di quella che si aveva nel caso di particelle non identiche, in quanto l'antisimmetrizzazione ha rimosso la degenerazione di scambio.

L'energia di questo stato è

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} \left(\frac{2}{a_1^2} + \frac{2}{a_2^2} + \frac{4}{a_3^2} \right) - \frac{3}{4} \hbar^2 B_0, \quad (19)$$

sia che gli a_i siano diversi sia che siano uguali.

Il secondo stato eccitato nel caso di particelle identiche è poi dato dalla configurazione in cui i numeri quantici spaziali sono come quelli del primo stato eccitato, ma $j = 1$. Poiché in tal caso la funzione d'onda di spin è simmetrica, quella spaziale va antisimmetrizzata. Si ha così nel caso a)

$$\psi'(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{(1,1,2)}(x_1)\phi_{(1,1,1)}(x_2) - \phi_{(1,1,1)}(x_1)\phi_{(1,1,2)}(x_2)) \cdot \chi(j = 1), \quad (20)$$

tre volte degenerare per i tre valori di m_j , mentre nel caso b) si ottengono i tre stati:

$$\psi'_a(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{(1,1,2)}(x_1)\phi_{(1,1,1)}(x_2) - \phi_{(1,1,1)}(x_1)\phi_{(1,1,2)}(x_2)) \cdot \chi(j = 1) \quad (21)$$

$$\psi'_b(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{(1,2,1)}(x_1)\phi_{(1,1,1)}(x_2) - \phi_{(1,1,1)}(x_1)\phi_{(1,2,1)}(x_2)) \cdot \chi(j = 1) \quad (22)$$

$$\psi'_c(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{(2,1,1)}(x_1)\phi_{(1,1,1)}(x_2) - \phi_{(1,1,1)}(x_1)\phi_{(2,1,1)}(x_2)) \cdot \chi(j=1) \quad (23)$$

ciascuno tre volte degenerare, dimodoché la degenerazione totale è pari a 9. L'energia di questo stato è

$$E_2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} \left(\frac{2}{a_1^2} + \frac{2}{a_2^2} + \frac{4}{a_3^2} \right) + \frac{1}{4} \hbar^2 B_0, \quad (24)$$

sia che gli a_i siano diversi sia che siano uguali.

5. Ordinamento dello spettro

Consideriamo lo spettro di energia dato dalla eq. (9). Poichè al crescere dei valori n l'energia cresce quadraticamente mentre il contributo proporzionale a B_0 non dipende dagli n , affinché l'ordinamento dei livelli non venga alterato dall'interazione dipendente dallo spin è sufficiente che quest'ultima spin non modifichi l'ordinamento dei primi due livelli del caso $B_0 = 0$. Questo succede se è soddisfatta la condizione

$$e_0 + \frac{3\hbar^2}{4} B_0 \epsilon(1) < e_1 - \frac{\hbar^2}{4} B_0 \epsilon(0) \quad (25)$$

dove

$$e_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4m} \left(\frac{1}{a_1^2} + \frac{1}{a_2^2} + \frac{1}{a_3^2} \right) \quad (26)$$

$$e_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} \left(\frac{2}{a_1^2} + \frac{2}{a_2^2} + \frac{5}{a_3^2} \right). \quad (27)$$

Pertanto la condizione è

$$B_0 < \frac{3\pi^2}{8ma_3^2}. \quad (28)$$

La condizione rimane ovviamente la stessa quando $a_1 = a_2 = a_3$.

6. Precessione dello spin

Nel caso in cui venga aggiunta l'interazione:

$$V_s = B_1 J^{(1)} \quad (29)$$

per calcolare la probabilità di precedere da un'autostato di \mathcal{H} con $m_j = 1$ ad $m_j = -1$ occorre considerare il modulo quadro dell'ampiezza di transizione:

$$|\langle 1, -1 | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (\mathcal{H}_s + V_s) t \right\} | 1, +1 \rangle|^2 = |\langle 1, -1 | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} B_1 J^{(1)} t \right\} | 1, +1 \rangle|^2. \quad (30)$$

dove è stato usato il fatto che gli stati iniziale e finale sono autostati di \mathcal{H}_s .

L'elemento di matrice (30) può essere calcolato utilizzando per lo spin totale la rappresentazione matriciale nella base cartesiana

$$(J^{(i)})_{jk} = -i\hbar\epsilon_{ijk} \quad (31)$$

e ricordando che, in questa rappresentazione, gli autostati dello spin totale lungo l'asse z sono dati da:

$$|+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (32)$$

Si deve quindi calcolare

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}B_1J^{(1)}t\right\} = \exp AB_1t \quad (33)$$

con

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (34)$$

Poiché si ha $A^3 = -A$, è possibile sviluppare l'esponenziale come:

$$\begin{aligned} \exp AB_1t &= 1 + AB_1t + \frac{1}{2!}(B_1t)^2A^2 - \frac{1}{3!}(B_1t)^3A - \frac{1}{4!}(B_1t)^4A^2 + \dots \\ &= 1 + A \sin(B_1t) - (1 - \cos(B_1t))A^2 \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(B_1t) & -\sin(B_1t) \\ 0 & \sin(B_1t) & \cos(B_1t) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (35)$$

Quindi l'ampiezza che ci interessa è:

$$\frac{1}{2}(1, i, 0) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(B_1t) & -\sin(B_1t) \\ 0 & \sin(B_1t) & \cos(B_1t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1 - \cos(B_1t)). \quad (36)$$

La probabilità di passare da $m_j = +1$ ad $m_j = -1$ è data dal quadrato dell'ampiezza eq. (36):

$$\mathcal{P}_{flip} = \frac{1}{4}(1 - \cos(B_1t))^2 \quad (37)$$

Alternativamente, l'elemento di matrice può essere calcolato esprimendo gli operatori di momento angolare nella base degli autostati di J_z , anziché nella base cartesiana eq. (31):

$$J_{\pm} = J^{(1)} \pm iJ^{(2)} \quad (38)$$

e i loro elementi di matrice:

$$\langle 1, m' | J_{\pm} | 1, m \rangle = \sqrt{(1 \mp m)(2 \pm m)} \hbar \delta_{m', m \pm 1}. \quad (39)$$

dai quali si ottiene facilmente la matrice $J^{(1)}$:

$$J_{m'm}^{(1)} = \langle 1, m' | \frac{J_+ + J_-}{2} | 1, m \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (40)$$

Dal'identità:

$$\left(\frac{J^{(1)}}{\hbar} \right)^3 = \frac{J^{(1)}}{\hbar} \quad (41)$$

si ottiene inoltre che l'esponenziale al secondo membro della eq. (30) può essere riscritto come:

$$\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} B_1 J^{(1)} t \right\} = 1 - \left(\frac{J^{(1)}}{\hbar} \right)^2 (1 - \cos(B_1 t)) - i \left(\frac{J^{(1)}}{\hbar} \right) \sin(B_1 t); \quad (42)$$

quindi, poichè:

$$\left(\frac{J^{(1)}}{\hbar} \right)^2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (43)$$

si ottiene

$$|\langle 1, -1 | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} B_1 J^{(1)} t \right\} | 1, +1 \rangle|^2 = \frac{1}{4} (1 - \cos(B_1 t))^2 \quad (44)$$

in accordo con il calcolo precedente.